

## **ICT E SUPERCALCOLO AL SERVIZIO DI RICERCA E IMPRESE**

### **Risultati e prospettive**

17 marzo 2015

### **Abstract degli interventi**

#### **09:40 Le novità della infrastruttura ICT ENEA per il calcolo scientifico e il supporto alle attività progettuali** *GIOVANNI BRACCO, ENEA*

La presentazione descriverà l'insieme delle risorse ENEA per il calcolo scientifico, sottolineando le novità nel settore del HPC (High Performance Computing) e segnalando anche gli altri strumenti ICT che possono essere significativi nello sviluppo delle attività istituzionali e progettuali svolte (storage condiviso, farm di nodi virtuali, strumenti collaborativi). In particolare per quanto riguarda le risorse HPC verrà descritta la nuova sezione speciale di CRESCO, dedicata a Big Data (nodi a grande memoria) ovvero alla sperimentazione su coprocessori di ultima generazione (Nvidia K40 e Intel PHI). In particolare il workshop può anche essere una occasione per raccogliere dall'utenza le eventuali espressioni di interesse per l'utilizzo di tali nuove tecnologie. Breve cenno verrà anche dato allo stato del mondo HPC sia a livello nazionale che internazionale.

#### **10:00 La simulazione numerica dei processi di combustione in ENEA** *FRANCA RITA PICCHIA, ENEA*

Nell'attesa che l'utilizzo dei combustibili fossili, come fonte primaria per la produzione di energia, venga soppiantato dalle fonti alternative a basse o zero emissioni di CO<sub>2</sub>, è necessario incentivare la ricerca di soluzioni tecnologiche che permettano un loro uso sostenibile dal punto di vista ambientale ed economico. Il Laboratorio Processi per la Combustione Sostenibile (COMSO), dell'Unità Tecnica "Tecnologie Avanzate per l'Energia e l'Industria", affronta questa tematica in modo organico mediante attività di R&S sui processi di combustione, di gassificazione e chimici, mediante studi teorici, simulazioni CFD e di processo ed attraverso la sperimentazione su impianti propri o di partner utilizzando tecniche diagnostiche avanzate.

Per quanto riguarda le tecnologie di combustione il principale settore di interesse è quello degli impianti di potenza turbogas, sebbene i risultati e gli strumenti sviluppati possano essere trasferiti anche in settori diversi, quale ad esempio il settore aerospaziale.

La modellistica e la simulazione numerica nella progettazione e nello studio delle tecnologie energetiche nel corso di questi anni hanno assunto un ruolo sempre più importante; anche l'industria investe sempre di più negli strumenti di simulazione, grazie alla rapida evoluzione tecnologica nel settore del calcolo avanzato caratterizzato da costi sempre più bassi.

#### **10:20 I risultati della collaborazione tra Avio ed ENEA nell'ambito dello spazio (settore lanciatori) nel settore aerospaziale in Europa** *FABIO PAGLIA, Avio*

Anche se i test sperimentali, per i lanciatori, costituiscono in linea generale lo standard per gli ingegneri, tuttavia il tempo per realizzarli, il costo e l'inevitabile ricaduta sul prezzo di lancio spingono verso un uso sempre più massiccio della simulazione numerica. Per far fronte a tale esigenza è dunque fondamentale disporre di risorse computazionali, nonché di competenze, adeguate.

La prossima generazione dei lanciatori europei, VEGA C, VEGA E, ARIAN6 dovrà far fronte ad un'agguerrita competizione.

Dal punto di vista Avio, le frontiere per la ricerca applicata nell'ambito delle simulazioni numeriche per la prossima generazione di lanciatori sono: galleria del vento virtuale, con particolare attenzione alla fasi di transizione soprattutto per configurazioni con più propulsori (multi-body). La modellizzazione multi-fisica delle camere di combustioni ibride, con una forte interazione tra la superficie del propellente solido le parti meccaniche e termo-chimica. Gli iniettori ad ossigeno liquido. Le camere di combustioni Ossigeno - Metano con "cooling" rigenerativo in fase tran-critica. La simulazione di cavitazione nelle turbopompe in fase transitoria.

E' intenzione di Avio continuare e rafforzare la collaborazione con ENEA nell'ambito della simulazione numerica.

#### **10:40 La modellistica molecolare per il design di nuovi materiali** *MASSIMO CELINO, ENEA*

Recenti analisi dell'ultima programmazione europea hanno mostrato che la modellistica molecolare è stata utilizzata in modo trasversale rispetto ai settori applicativi e che è sufficientemente matura per affiancare allo sviluppo dei modelli il loro utilizzo in ambito industriale. La modellistica molecolare permette il design e la caratterizzazione dei materiali a livello atomico riuscendo a connettere le proprietà macroscopiche con i processi chimico-fisici microscopici.

#### **11:00 Simulazioni numeriche di meso camere di combustione con moto di swirl** *ANGELO MINOTTI, Sapienza Università di Roma*

Le richieste sempre crescenti di energia, in termini di potenza e disponibilità, impongono sforzi per la progettazione di nuovi dispositivi con elevati fattori di produzione.

Questo lavoro riporta un nuovo dispositivo, in grado di fornire energia utilizzando il sole, ed i reagenti chimici (idrogeno e/o idrocarburi), in modo sia separato che accoppiato. Lo studio e la realizzazione di questo dispositivo ibrido è stato finanziato dalla comunità europea all'interno del 7° programma quadro (sezione tecnologie emergenti).

Le simulazioni numeriche dei flussi reattivi e dell'interazione flusso-struttura sono stati effettuati adottando la piattaforma CRESCO 4.

CRESCO4 ha permesso di modificare la geometria e/o le condizioni al contorno ed operative contestualmente con le richieste provenienti dagli apparati sperimentali ed i risultati ottenuti hanno contribuito alla definizione di un brevetto internazionale.

### **11:50 ICT e nucleare da fissione: dati di base, sviluppo degli impianti innovativi (Generation IV), progettazione di esperienze nei reattori da ricerca**

*NUNZIO BURGIO, ENEA*

La tradizione dell'uso delle tecnologie informatiche nel nucleare da fissione ha radici in epoche precedenti al sviluppo capillare dell' ICT stesso. Sarà fornita una breve panoramica degli usi tipici dell' ICT nei vari settori del nucleare da fissione (radioprotezione e shielding, studi di Scenario, studi incidentali, CFD e termomeccanica, dati nucleari). Infine sarà presentato un esempio abbastanza calzante dell'uso quotidiano delle simulazioni numeriche nella progettazione di esperienze di irraggiamento nei reattori da ricerca TAPIRO e TRIGA. Cenni ad impieghi futuri.

### **12:10 I modelli del clima in ENEA**

*GIANMARIA SANNINO, ENEA*

Il clima del nostro pianeta è un sistema complesso, in cui le diverse componenti interagiscono su molte scale di tempo e di spazio mediante innumerevoli meccanismi di retroazione non lineare. Lo studio del clima è multidisciplinare e richiede tutti gli strumenti scientifici e tecnologici oggi a disposizione, dalla misura e osservazione al suolo e da satellite all'analisi dei dati, agli sviluppi concettuali e alla costruzione di modelli dinamici e numerici dell'intero Sistema Terra. In particolare, per ottenere stime quantitative dell'evoluzione del clima nei prossimi decenni, cruciali anche da un punto di vista applicativo, è necessario costruire modelli numerici in grado di descrivere la ricchezza del sistema climatico, includendo rappresentazioni dell'atmosfera, dell'oceano, del suolo e del sottosuolo, della biosfera e dei principali cicli biogeochimici. Punto di partenza per ottenere proiezioni future sono i modelli globali, in grado di descrivere la dinamica del sistema climatico su tutto il nostro pianeta. Per ottenere una descrizione dettagliata delle proiezioni climatiche su porzioni limitate della terra, si sono sviluppati accurati modelli regionali, che seppur concettualmente simili a quelli globali, sono pensati esplicitamente per raggiungere risoluzioni più alte in specifiche macroregioni, alcune delle quali sono particolarmente vulnerabili ai cambiamenti climatici, quali ad esempio l'area del Mediterraneo. Grazie al sistema di calcolo dell'ENEA, e più recentemente ai sistemi messi a disposizione dai bandi europei PRACE, l'ENEA si è affermata come uno dei centri di ricerca leader in Europa nello sviluppo di modelli regionali per le previsioni di scenari climatici nell'area Euro-Mediterranea. Nel corso della presentazione saranno mostrati i risultati di maggiore rilievo ottenuti da ENEA in questo campo e le sue ricadute nello sviluppo di nuove attività di ricerca sull'energia dal mare.

### **12:30 Smart Cities: tecnologie abilitanti ed infrastrutture ICT**

*MAURO ANNUNZIATO, ENEA*

Come indica lo stesso termine, le Smart Cities sono città in cui un ampio insieme di reti e di servizi urbani sono legate tra loro al fine di rendere la città più sostenibile sia dal punto di vista energetico ambientale che dal punto di vista della qualità della vita. Tale legame tecnologico è nella maggior parte dei casi fondato sulla misura, sul trasporto, sulla elaborazione e sulla disponibilità di accesso ad informazioni strategiche che possono entrare a far parte della pianificazione della città, come della gestione delle sue utilities urbane come infine della vita quotidiana del cittadino. ENEA, attraverso un insieme di progetti dimostrativi urbani sta sviluppando delle architetture ICT ed una modellistica per offrire al territorio delle soluzioni integrate caratterizzate da una armonizzazione tra piattaforme verticali finalizzate a specifici domini della città con piattaforme orizzontali finalizzate al trasporto, integrazione e gestione di informazioni.

### **14:10 Efficienza energetica nelle attività computazionali: il progetto DC4Cities**

*ANDREA QUINTILIANI, ENEA*

Il tema dell'efficienza energetica nelle attività computazionali ha assunto negli anni un'importanza via via crescente, di pari passo con l'aumentare della spesa per i consumi energetici delle infrastrutture. L'intervento fornirà alcuni lineamenti generali di questa problematica, ed esperienze e risultati maturati nell'ambito della partecipazione al progetto europeo DC4Cities che ha compreso anche una fase di benchmark e verifica su risorse ICT interne ENEA.

### **14:30 Simulazioni ibride (fluide/Particle-in-cell) per la fusione termonucleare**

*GREGORIO VLAD, ENEA*

La fusione termonucleare controllata è una delle fonti energetiche più promettenti per il prossimo futuro. Riprodurre in laboratorio i processi nucleari che avvengono nel nucleo di stelle è una delle principali sfide della ricerca avanzata.

La fusione termonucleare si verifica quando i nuclei di elementi leggeri (come l'idrogeno o i suoi isotopi) fondono in elementi più pesanti, quali l'elio, liberando in questo processo una grande quantità di energia.

Per poter fondere tali elementi, è necessario riscaldarli alle energie dell'ordine di diverse decine di milioni di gradi: in questa condizione, il gas è altamente ionizzato ("plasma").

L'approccio attualmente più promettente è la cosiddetta "Fusione a confinamento magnetico", e le macchine sperimentali più avanzate sono i "Tokamaks" (p.es., ITER).

Il raggiungimento delle condizioni di "accensione" e "autosostentamento" del plasma è un processo fortemente condizionato dalla proprietà di "confinamento", all'interno del plasma stesso, dei nuclei di elio altamente energetici, prodotti dalla reazione stessa. Interazioni mutue tra onde presenti nel plasma e le particelle energetiche possono indurre la perdita delle particelle energetiche stesse. Lo sviluppo di modelli teorici e computazionali per lo studio di tale fenomenologia è di rilevante importanza per il successo degli esperimenti futuri. A tale proposito, nei laboratori di Frascati è in corso da diverso tempo lo sviluppo e l'utilizzo di codici ibridi (fluido/Particle-in-cell) in grado di studiare

tale problema con applicazioni potenzialmente di grande interesse per macchine della generazione presente e futura (p. es., ITER).

#### **14:50 Modellistica di qualità dell'aria: supporto alle politiche nazionali e industriali**

*GABRIELE ZANINI, ENEA*

In 12 anni, il progetto MINNI (National Integrated Modelling system for International Negotiation, [www.minni.org](http://www.minni.org)), sviluppato da ENEA per il Ministero dell'Ambiente e della Tutela del territorio e del Mare, ha prodotto simulazioni modellistiche di qualità dell'aria, misure sperimentali e valutazioni di impatto ambientale con ampia copertura spaziale e temporale. Il calcolo modellistico, che richiede elevate risorse computazionali e per l'archiviazione dei dati, è stato effettuato su piattaforme di supercalcolo di livello internazionale: fino al 2007 presso il CINECA e dal 2008 su CRESCO, il che ha permesso non solo di investire su una infrastruttura sviluppata in-house da ENEA ma anche di passare da una fase fortemente "programmata" nell'utilizzo del CINECA ad una fase di sviluppo scientifico.

Sono stati simulati 10 diversi anni meteoemissivi a 2 diverse risoluzioni e 1 campagna sperimentale a 3 risoluzioni, per un totale dell'ordine di 130 anni di calcolo, con un'occupazione di memoria di circa 80 TB. Oggi il database sviluppato ha permesso di intraprendere moltissime azioni scientifiche a supporto della Pubblica Amministrazione Centrale (studio della rappresentatività spaziale delle stazioni della Reti Speciali, sistemi, come il tool M-TraCE, di supporto alla caratterizzazione del regime di circolazione di un sito, ai fini della pianificazione di nuove reti o per l'interpretazione di misure sperimentali o a supporto di validazioni modellistiche di qualità dell'aria).

Dalla metà del 2012 la partecipazione all'esercizio europeo di intercomparison modellistico EURODELTA3 ([http://emep.int/publ/reports/2014/MSCW\\_technical\\_1\\_2014.pdf](http://emep.int/publ/reports/2014/MSCW_technical_1_2014.pdf)) ha portato il Sistema Modellistico Atmosferico dell'Unità a simulare anche su un dominio europeo. Le competenze sviluppate e, ulteriori investimenti in storage, ci hanno permesso di lavorare anche in studi di qualità dell'aria a microscala nell'intorno di importanti sorgenti puntuali nazionali, nonché di fornire un significativo contributo alla ricerca epidemiologica nazionale sugli effetti sanitari dell'inquinamento atmosferico (EPIAIR, VIIAS) e a prime valutazioni di Danno Sanitario. E' stato altrettanto possibile attuare azioni di Assistenza Tecnica e Trasferimento Scientifico nell'ambito di progetti di Cooperazione del Ministro degli Affari Esteri e della Cooperazione Scientifica.

#### **15:10 Dinamica molecolare ab-initio di nitrati fusi**

*ROBERTO GRENA, ENEA*

I sali fusi sono largamente usati come vettore energetico in impianti solari termici; quelli maggiormente usati a questo scopo sono miscele di nitrati. La possibilità di prevedere le proprietà fisiche e chimiche di una miscela è quindi di notevole interesse. La dinamica molecolare ab-initio permette di investigare le proprietà dei sali e di ricavare indicazioni utili per il loro impiego. Viene qui presentata l'impostazione generale di una simulazione di nitrati fusi con dinamica molecolare Car-Parrinello, con i primi risultati ottenuti sulla struttura microscopica del sale fuso e sulla mobilità degli ioni, e una breve discussione sulle quantità utili che è possibile calcolare.

#### **15:30 Applicazioni dei codici di calcolo nucleari e agli elementi finiti nelle attività di ricerca dell'Istituto Nazionale di Metrologia delle Radiazioni Ionizzanti**

*LINA QUINTIERI, ENEA*

L'unità METR utilizza estensivamente codici di Calcolo Monte Carlo (MCNP/X, GEANT4, FLUKA, EGSnrc) per il trasporto e l'interazione della radiazione ionizzante con la materia, al fine di conseguire gli obiettivi scientifici e tecnologici delle molteplici attività di ricerca e sviluppo in cui risulta coinvolta (in collaborazione con enti di ricerca nazionali ed internazionali, altri Istituti Metrologici Europei, strutture ospedaliere, ecc). Nella presentazione verranno descritte le principali attività di simulazione (Monte Carlo e agli Elementi Finiti) in corso e i principali risultati ottenuti in alcuni progetti scientifici, avvalendosi della piattaforma di calcolo cresco4 e di una sinergica interazione con il personale UTICT.